

전기재료

에너지 밴드와 전기전도

2016년 1학기

4th class

장지훈

1. 수소원자에서의 에너지 밴드 형성

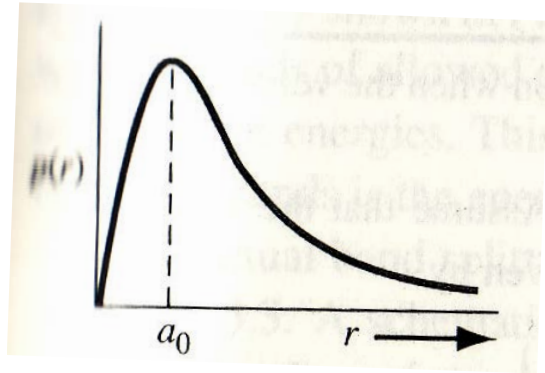
■ 수소원자의 분자화

- ⇒ 전자들은 가장 안정한 상태로 존재하려 한다.
 - H_2 가 $2H$ 보다 에너지적으로 더 안정하다.
 - H 의 전자 에너지 : -13.6eV
 - H_2 의 전자 에너지 : $(-13.6\text{eV} \times 2) - \text{결합에너지 } (4.5\text{eV})$
- ⇒ 수많은 원자들이 모여 있다면 전자들은 가장 안정한 상태로 존재하기 위하여 상호작용하며 위치한다.

1. 수소원자에서의 에너지 밴드 형성

■ 에너지 밴드의 형성

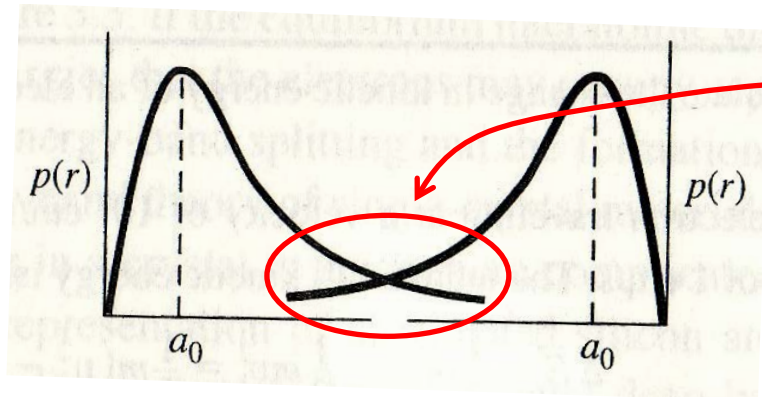
- 고립된 수소원자의 확률밀도함수



* $p(r)$: r 위치에 원자가 있을 확률

* a_0 : 최저전자에너지

- 근접한 두 원자들의 확률밀도함수

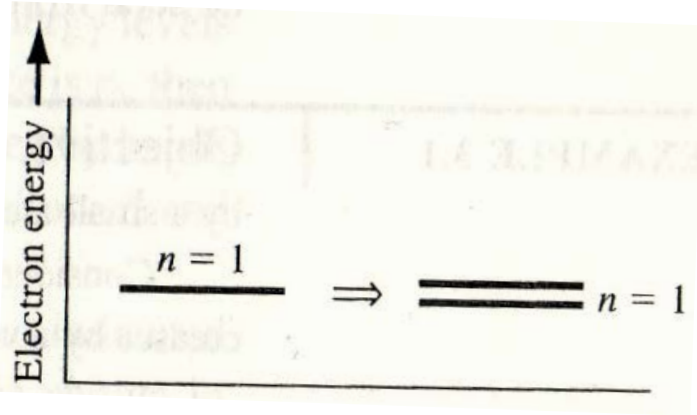


두 원자간의 상호작용

1. 수소원자에서의 에너지 밴드 형성

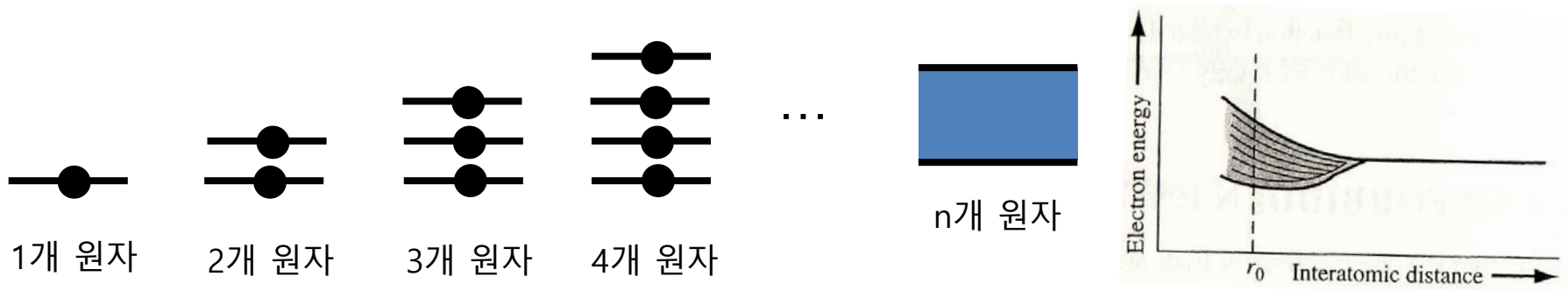
■ 에너지 밴드의 형성

- 파울리의 배타원리를 만족하는 에너지 준위



* 두 개의 불연속적인 에너지 준위로 분리
→ 에너지 준위의 다발 (band)를 형성

- n 개의 원자가 상호작용할 때의 에너지 준위 : 밴드 형태를 형성



* r_0 : (원자간) 평형간격

1. 수소원자에서의 에너지 밴드 형성

■ 에너지 간격의 크기

- 파울리의 배타원리

: 전자는 같은 양자상태에 두 개의 전자가 동시에 존재할 수 없다.

→ 양자 상태의 총수 \geq 총 전자의 수

- 에너지 준위에 존재하는 양자상태의 수는 한정되어 있음. (많지 않음)

→ 결정의 모든 전자들을 수용하기 위해서는 허용 밴드에 많은

에너지 준위를 가져야 함 → **준 연속적인 에너지 준위의 분포를 가짐**

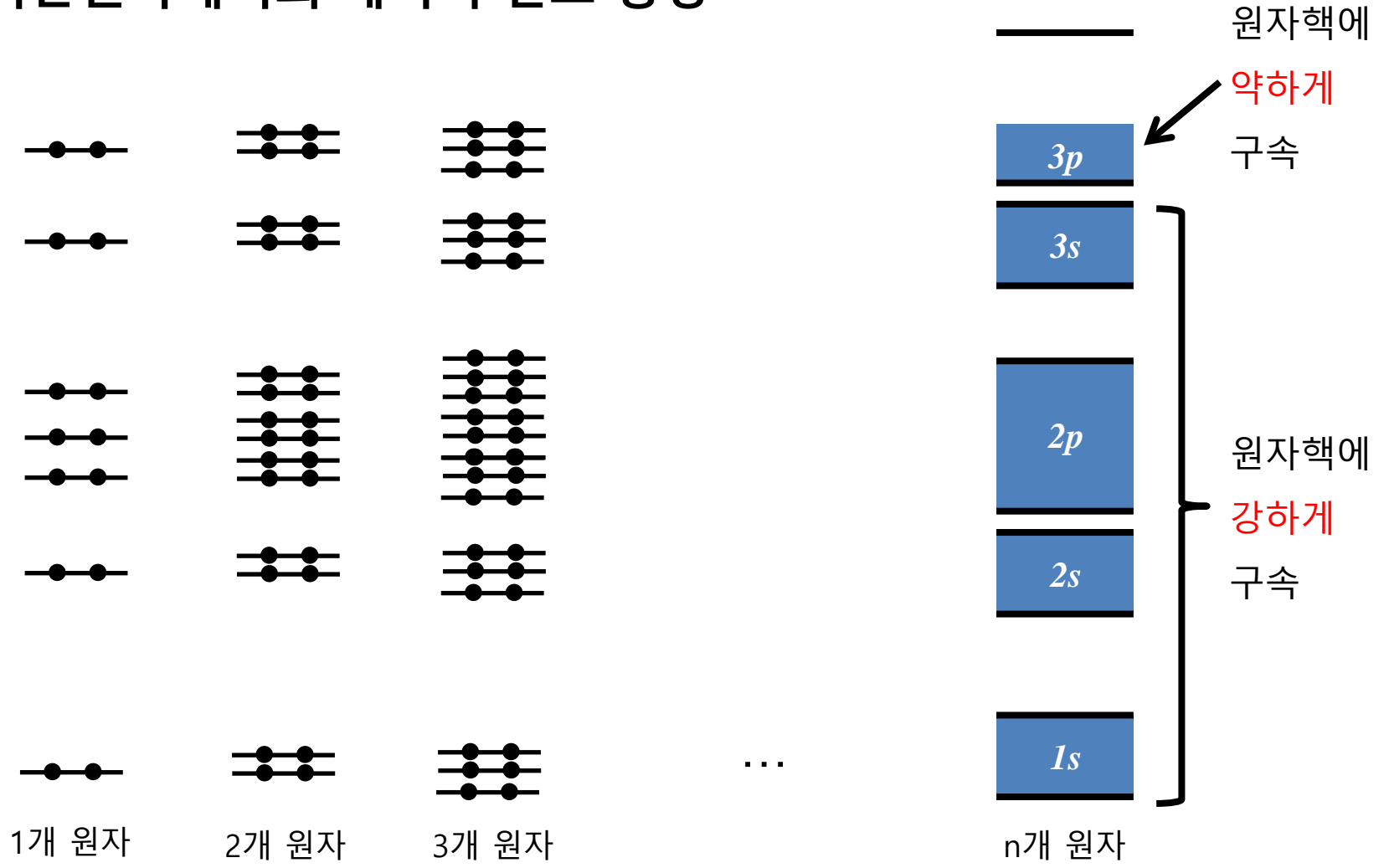
ex) 10^{19} 개의 전자 한 개를 보유한 10^{19} 개의 원자들로

이루어진 계에서 허용된 에너지 밴드의 폭이 1eV 라면

에너지 준위들은 10^{-19} eV 간격으로 떨어져 있다.

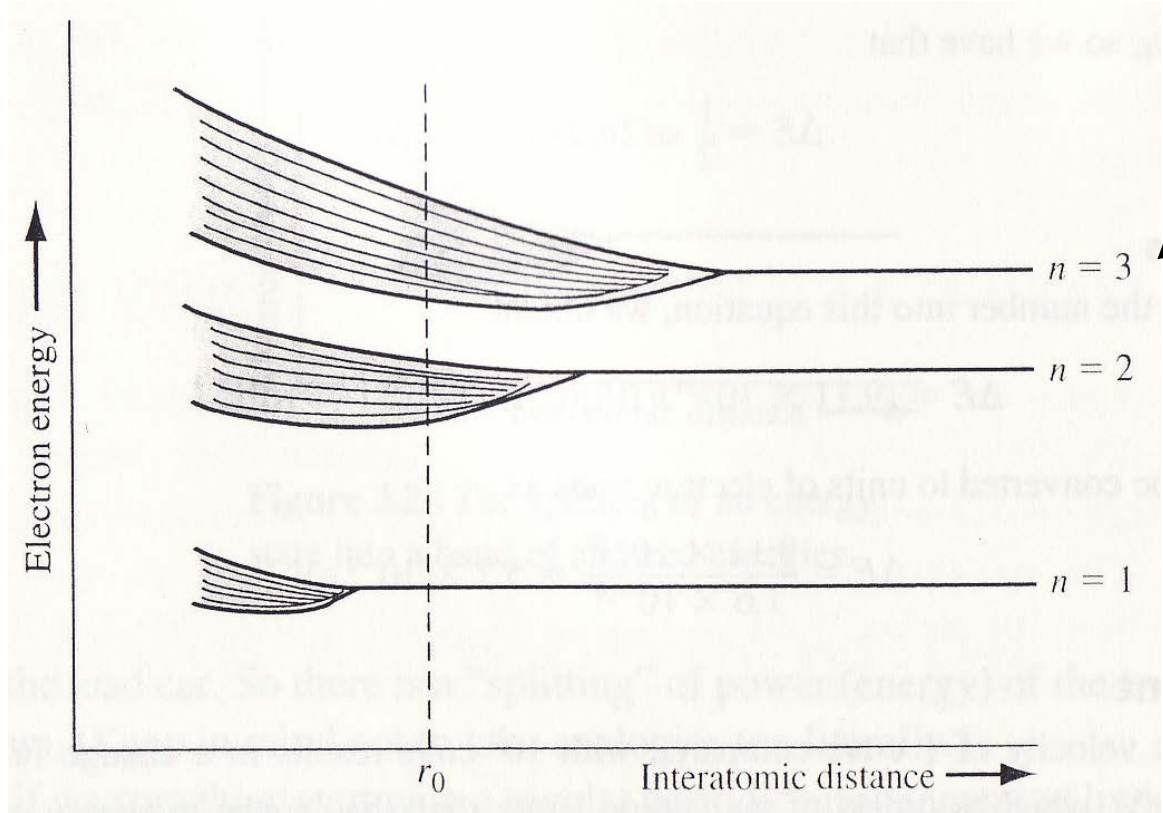
2. 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성

■ 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성



2. 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성

■ 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성



원자핵에
약하게
구속

원자핵에
강하게
구속

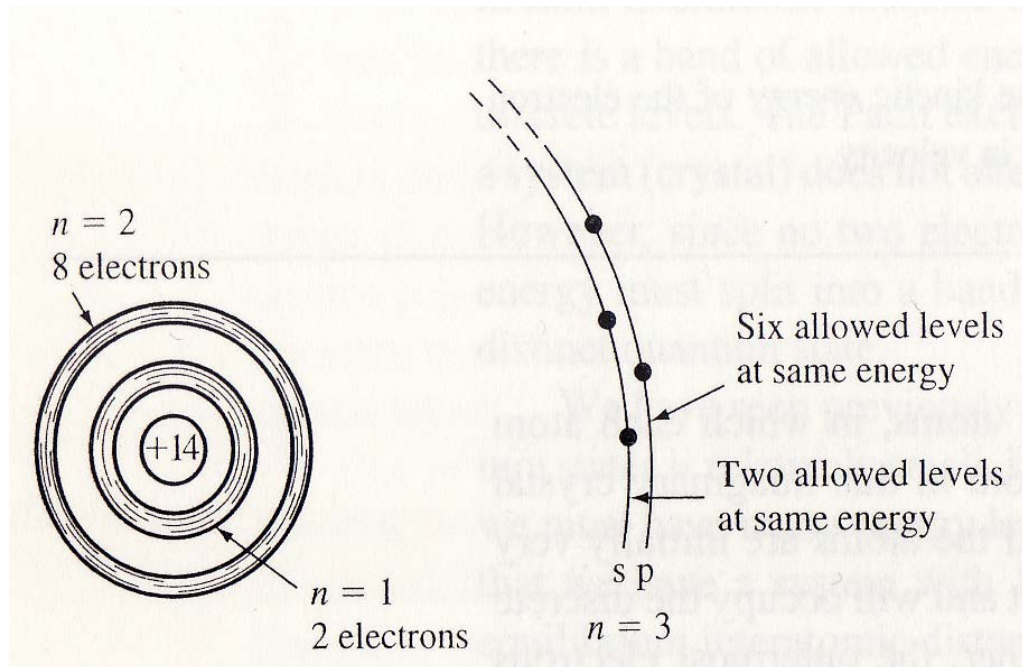
⇒ $n = 3$ 에너지 준위만 고려

2. 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성

■ 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성

- 최외각 전자의 배치

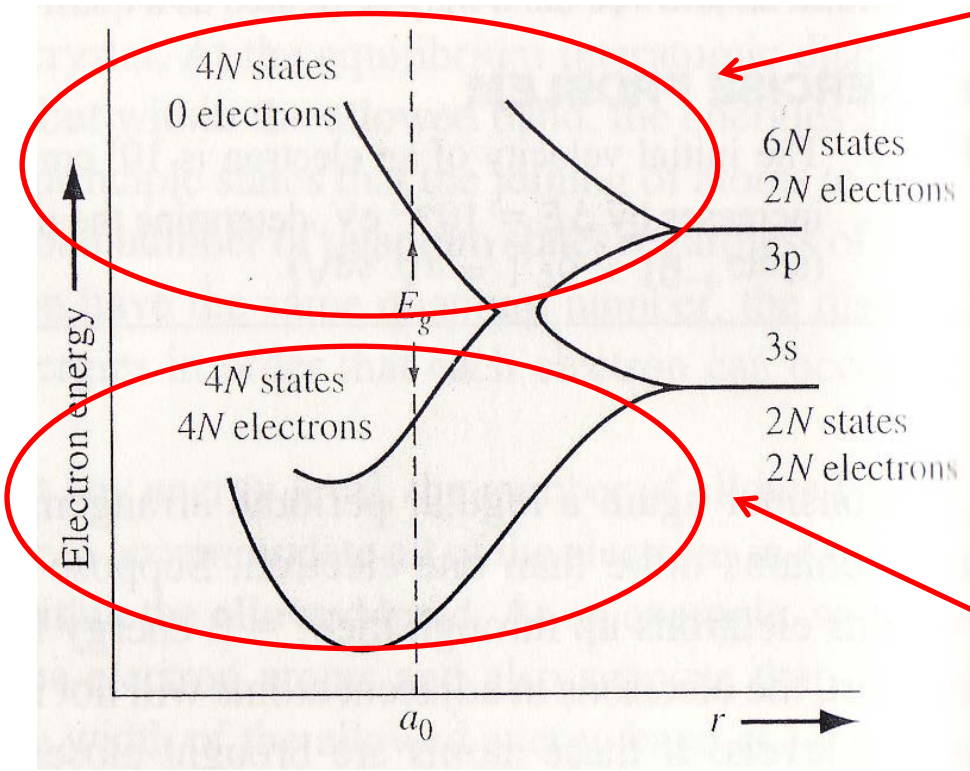
3s : 양자상태 = 2, 전자개수 = 2 / 3p : 양자상태 = 6, 전자개수 = 2



2. 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성

■ 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성

- T = 0K 일 때, 실리콘원자에서의 전자 배치
- : 전자들은 가장 낮은 상태에 위치



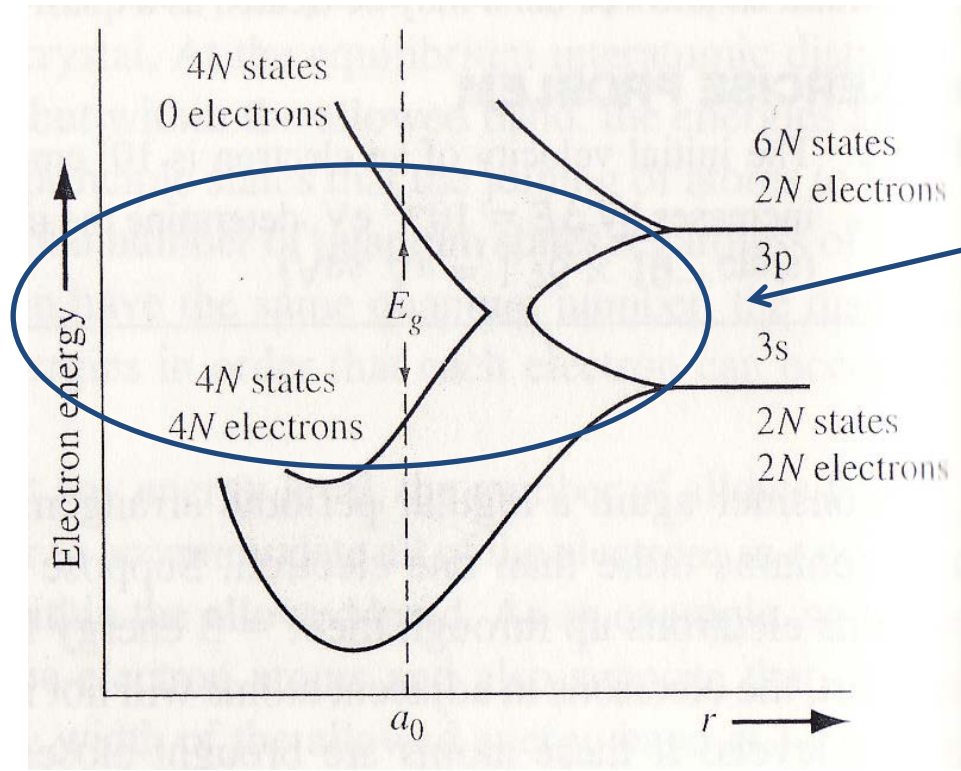
전도대 (conduction band)
전자가 비어 있는 밴드

가전자대 (valence band)
; 전자가 가득 차 있는 영역

2. 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성

■ 실리콘원자에서의 에너지 밴드 형성

- $T = 0K$ 일 때, 실리콘원자에서의 전자 배치
: 전자들은 가장 낮은 상태에 위치



에너지 밴드갭 (energy band gap)
: 가전자대와 전도대 사이의 에너지 간격
: $T > 0K$ 에서도 이 사이에서는 전자가 위치할 수 없다.
(금지대역 : forbidden band)

3. 에너지 밴드

■ 에너지 밴드의 고찰

- 가전자대 (valence band, VB)

: 특정한 원자핵에 속박되어 있는 가전자가 차지하는 에너지대

- 전도대 (conduction band, CB)

: 전자가 자유로이 이용(이동)되는 허용 에너지대

- 밴드갭 (band gap, 에너지갭, 금지대)

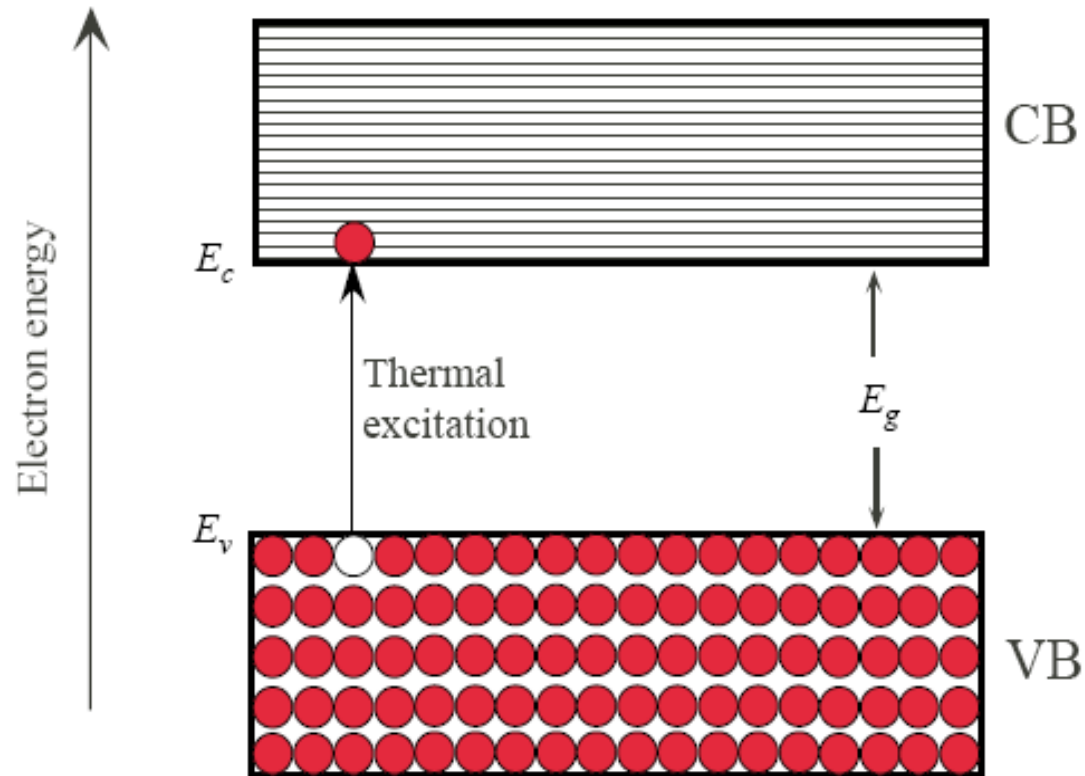
: 가전자대와 전도대 사이의 에너지 간극

전자가 위치 할 수 없다.

가전자대의 속박되어 있는 전자는 외부 에너지를 받아 전도대로 이동한다.

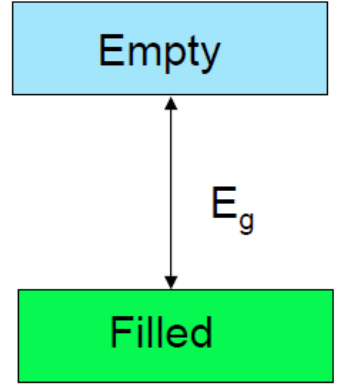
3. 에너지 밴드

■ 에너지 밴드의 모식도

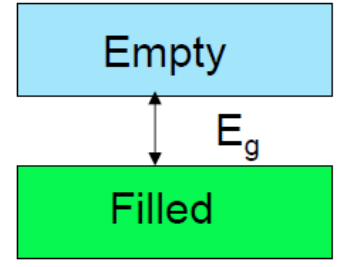


3. 에너지 밴드

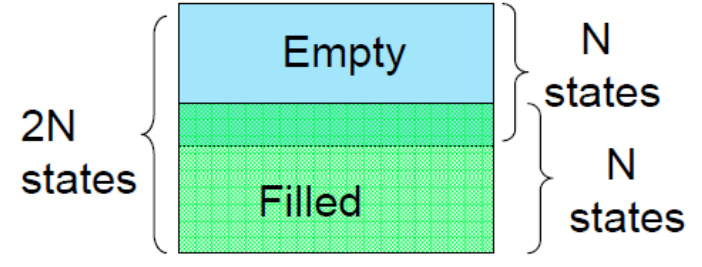
■ 재료에 따른 에너지 밴드 및 반도체



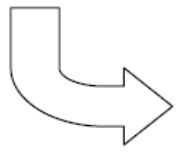
Insulator : $E_g > 2\sim 5\text{eV}$
 Ex.: $\text{SiO}_2 \sim 9\text{eV}$



Semiconductor : $E_g < 2\text{eV}$
 Ex.: Si $\sim 1.12\text{eV}$



Conductor



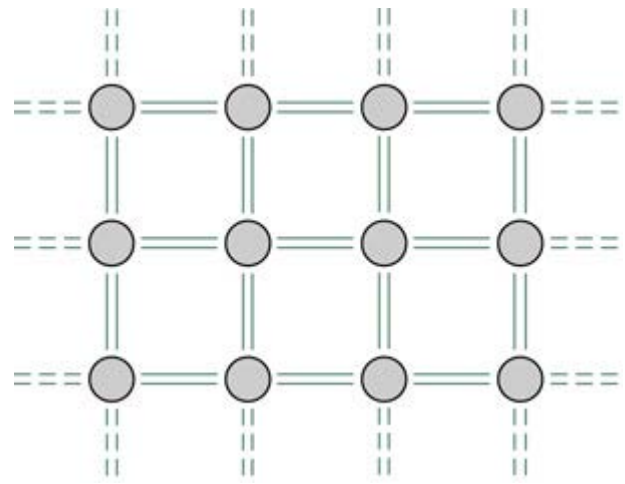
Semiconductor

Ge	0.67eV
Si	1.12
InP	1.34
GaAs	1.42
GaP	2.24
GaN	3.5
SiC	2.2~3.3
Diamond	5.5

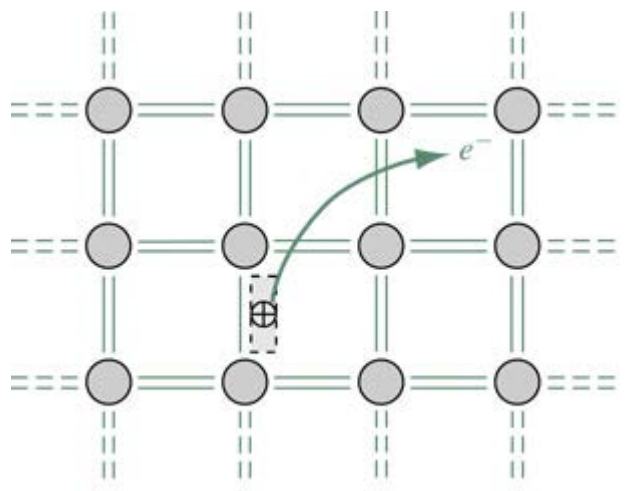
4. 전기전도

■ 자유전자

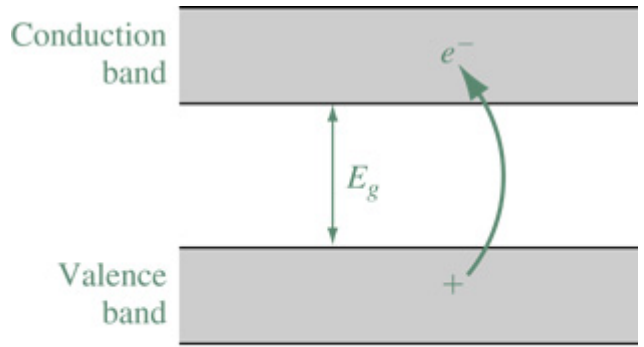
: 이동이 자유로운 전자
전도대에 위치



T = 0K



(a)



(b)

T > 0K

4. 전기전도

■ 자유전자

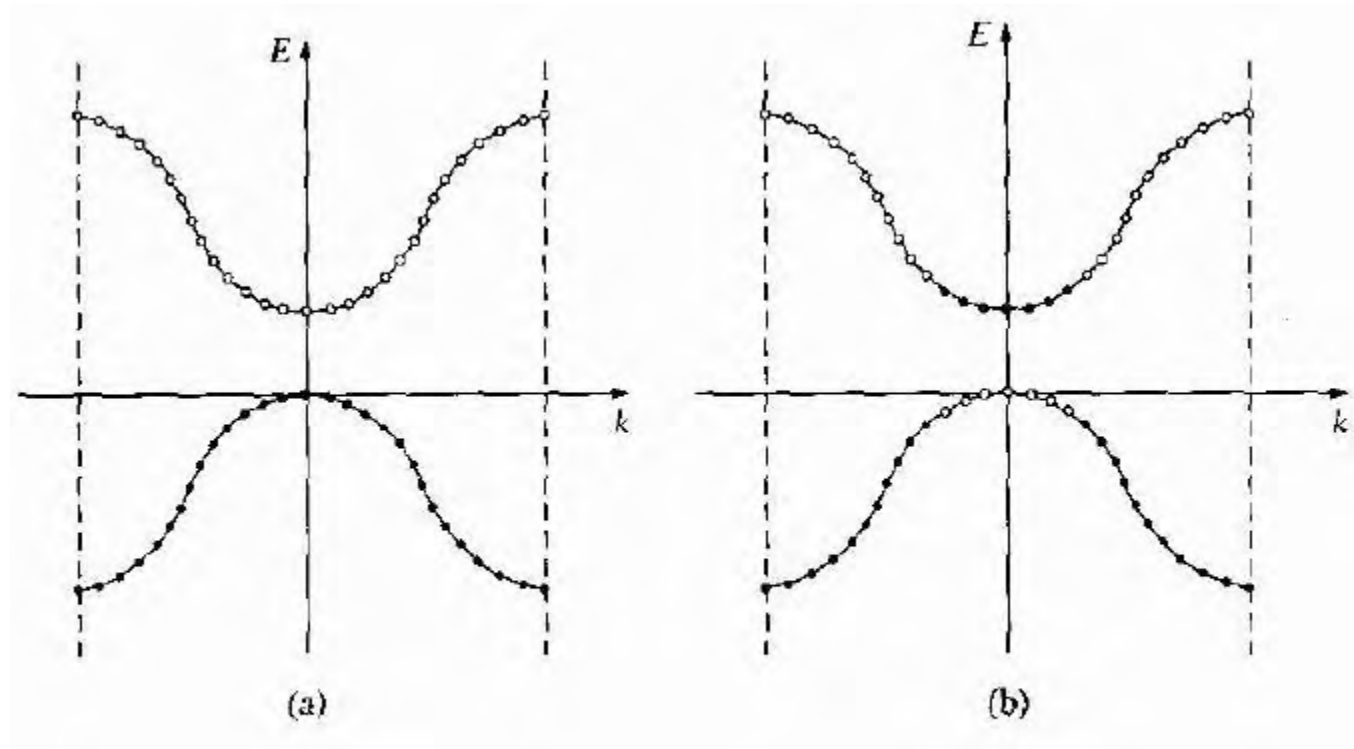


Figure 3.14 † The E versus k diagram of the conduction and valence bands of a semiconductor at (a) $T = 0\text{ K}$ and (b) $T > 0\text{ K}$.

$T = 0\text{ K}$

$T > 0\text{ K}$

4. 전기전도

■ 정공

: 자유전자 생성에 의해 생성된 가전자대의 빈 공간 (입자로 생각)

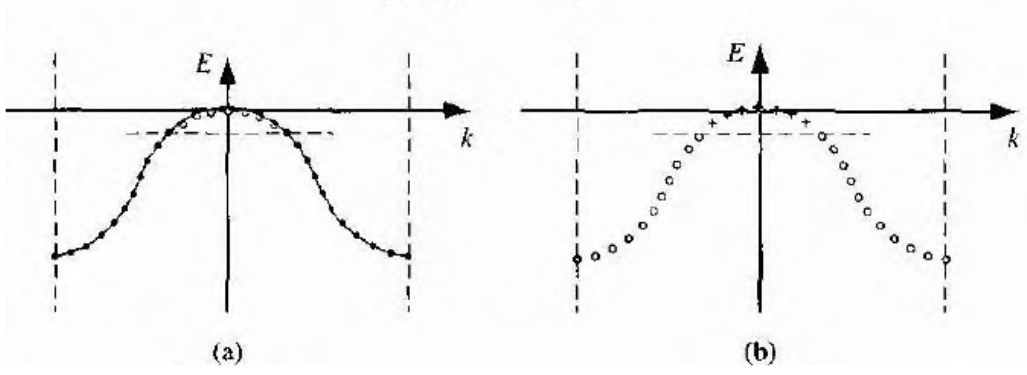
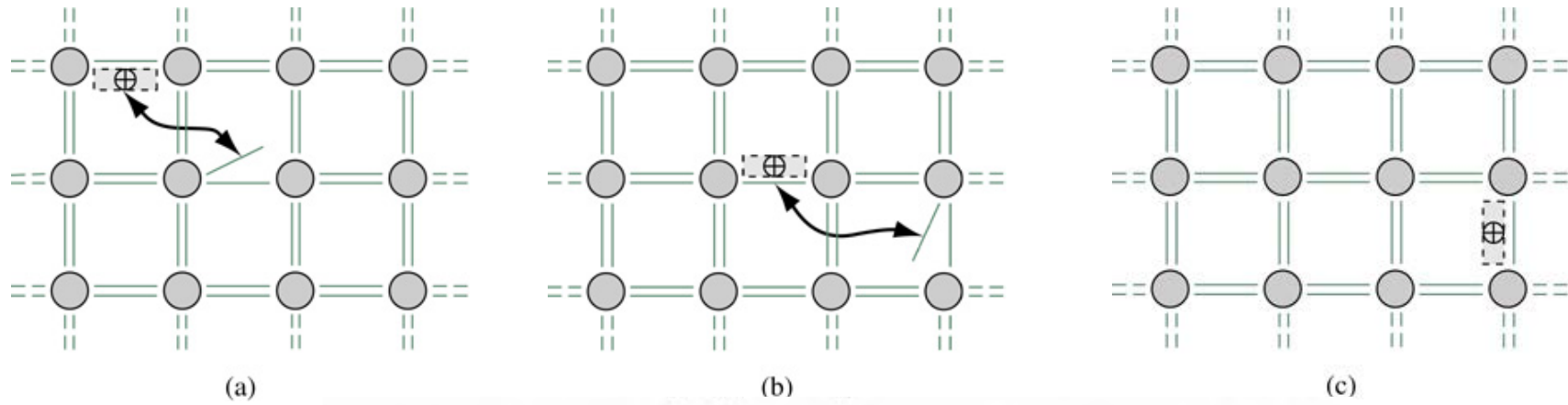
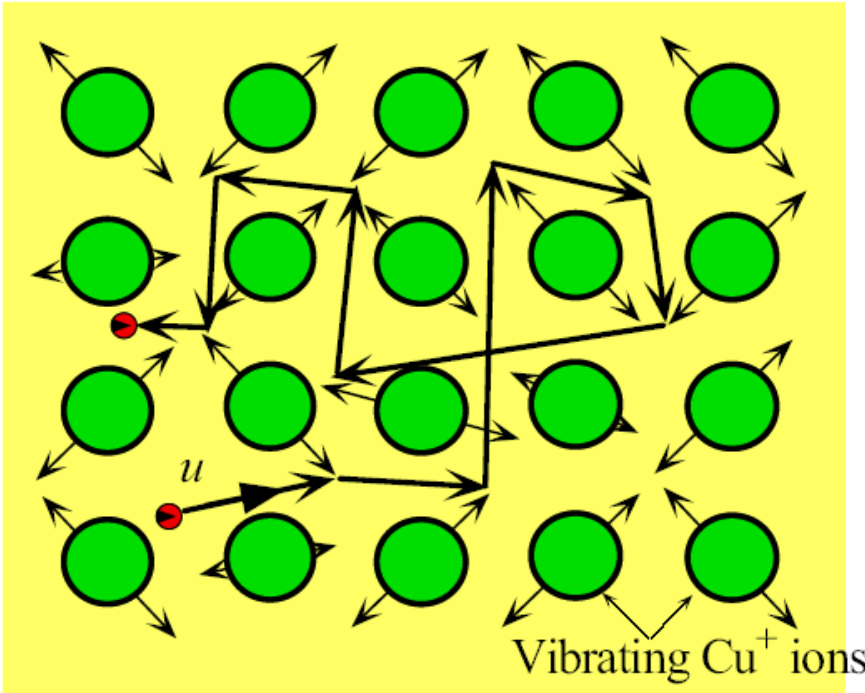


Figure 3.18 (a) Valence band with conventional electron-filled states and empty states. (b) Concept of positive charges occupying the original empty states.

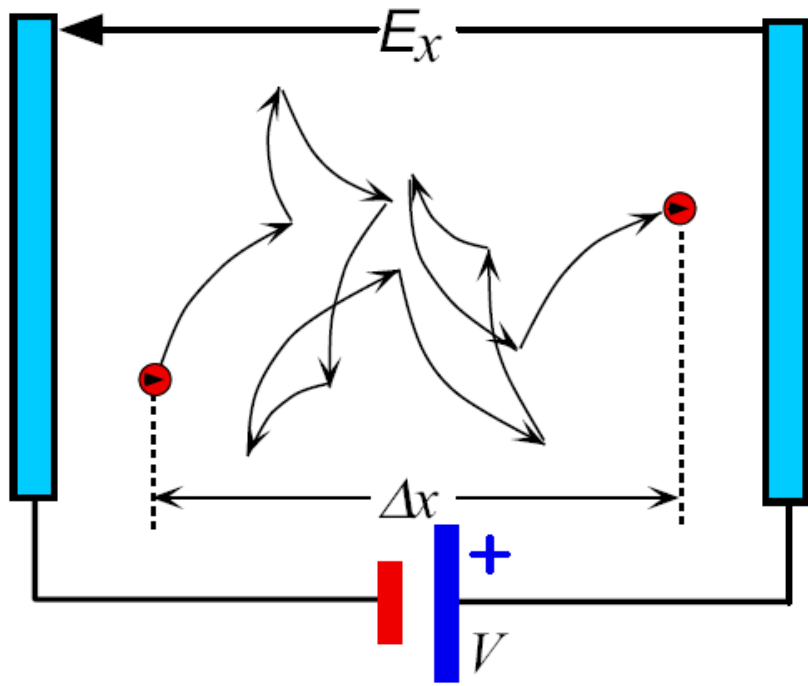
4. 전기전도

■ 전자의 열운동 vs 드리프트 운동

- 열운동



- 전기장 인가 (열운동 + 드리프트)



4. 전기전도

■ 유효질량 (effective mass)

- 결정 안 전자의 겉보기 질량

- 전자끼리의 상호작용 혹은 운동량에 따라 전자의 운동에너지가 증가/감소

$$- F_{\text{total}} = F_{\text{ext}} + F_{\text{int}}$$

→ 결정 안을 움직이는 전자의 파동-입자 운동은 자유전자의 운동과는 다르다.

→ 이와 같은 현상을 수식적으로 표현하기 위해서 고안된 개념.

■ 유효질량 의 의미

- 결정 안에서 전자끼리의 상호작용 혹은 운동량에 의한

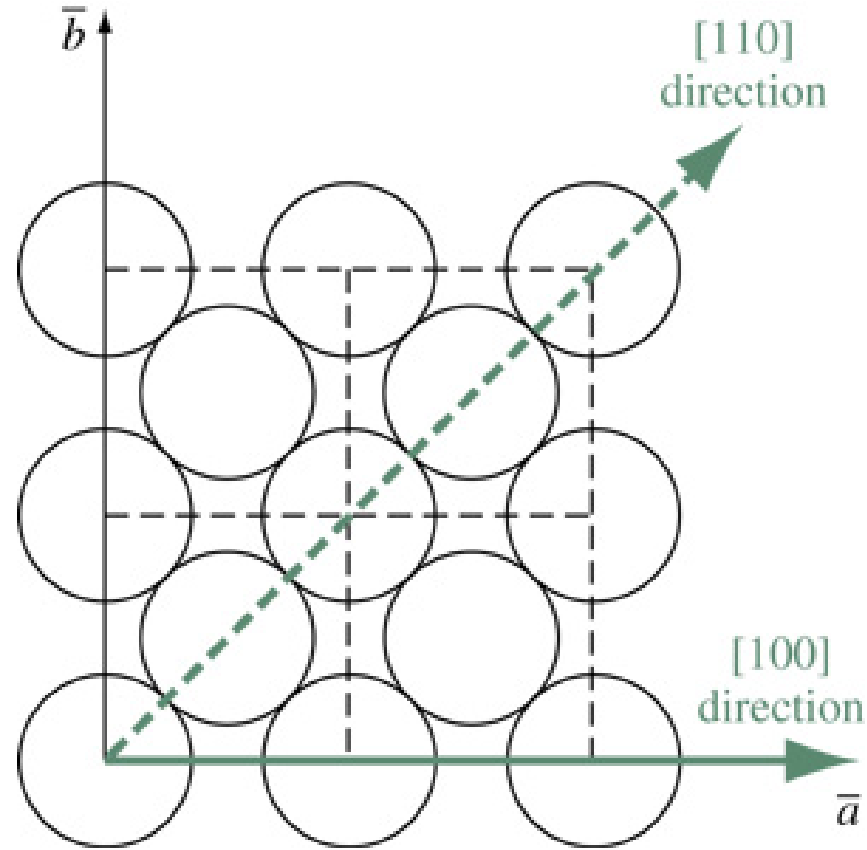
전자의 운동에너지가 증가/감소하는 현상을 전자의 질량변화로 대체

→ 결정 안의 전자의 운동을 자유전자의 운동으로 분석 가능

→ 뉴턴역학에 의한 분석이 가능

4. 전기전도

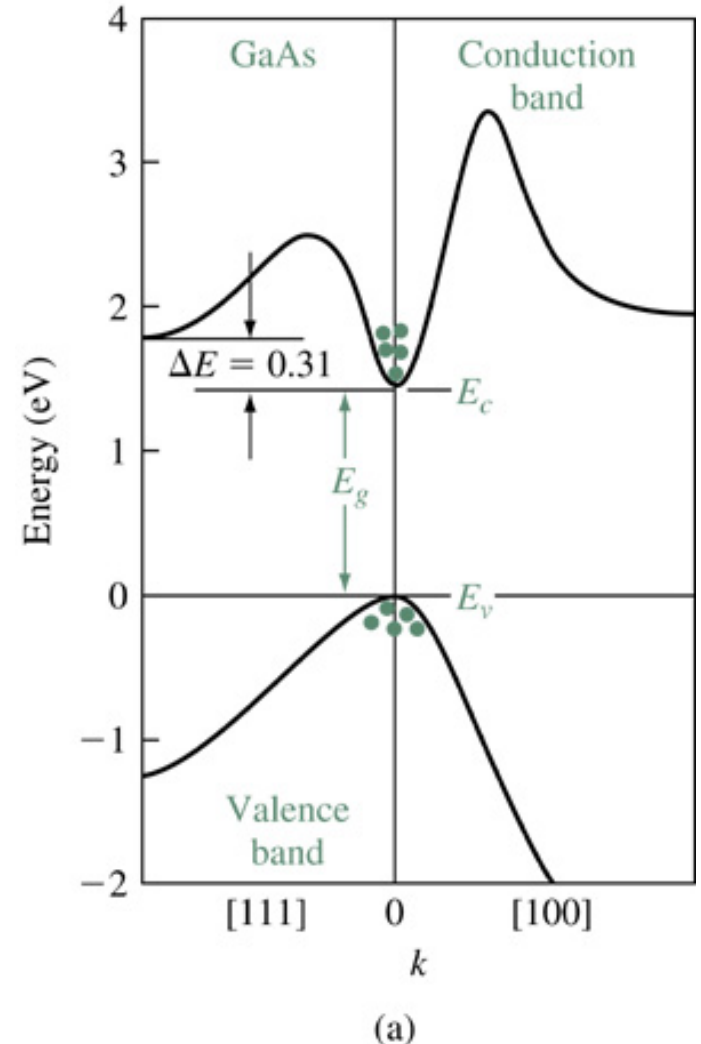
■ 3차원 개념으로의 확장



4. 전기전도

■ 직접천이 반도체 (Direct band gap)

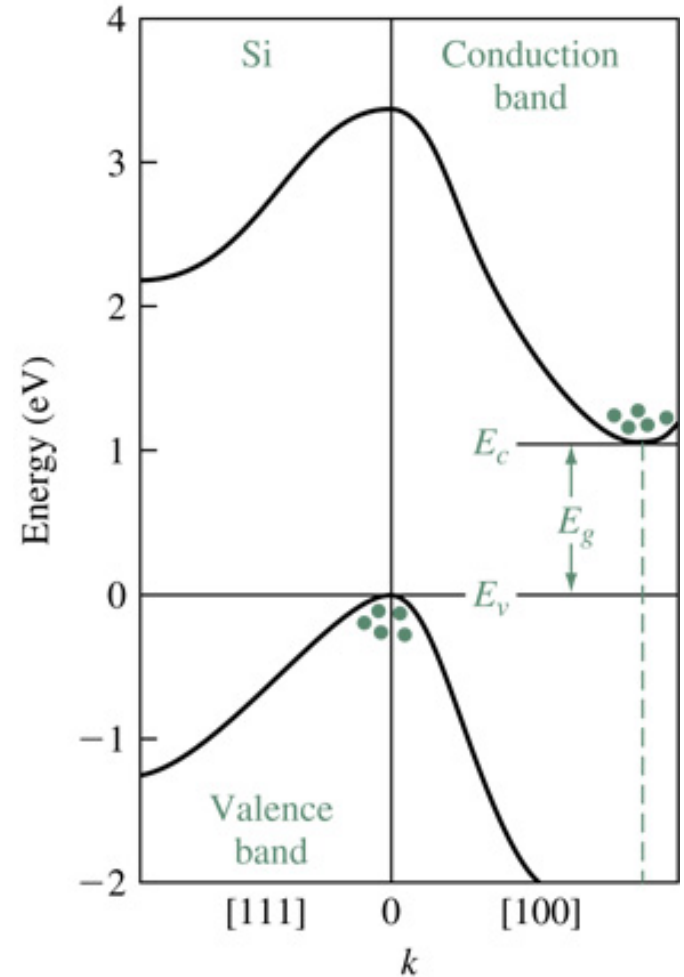
- 가전대역에서 에너지 준위가 최고가 되는 운동량과 전도대역에서 에너지 준위가 최소가 되는 운동량의 값이 일치하는 반도체
- GaAs, InP, GaN 등



4. 전기전도

■ 간접천이 반도체 (Indirect band gap)

- 가전대역에서 에너지 준위가 최고가 되는 운동량과 전도대역에서 에너지 준위가 최소가 되는 운동량의 값이 일치하지 않는 반도체
- GaAs, InP, GaN 등



(b)